FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA XVII.

Kolozsvár, 2012. március 22–23.

A CSL SZEMCSEHATÁR-MODELL ÉS JELENTŐSÉGE

VARGA Péter

Abstract

The boundaries between grains are part of the microstructure, which has a great influence on the properties of polycrystalline materials. Through 'grain boundary design' some of the materials properties can be altered. How could the properties of the grain boundaries be described by their geometry? This question is present over many decades. This paper deals with the 'coincidence site lattice' (CSL) concept - the most commonly used method for describing the grain boundary structure - and its validity.

Key words:

grain boundary, GBE, grain boundary energy, grain boundary plane, grain boundary misorientation, CSL

Összefoglalás

A polikristályos anyagok tulajdonságait meghatározó mikroszerkezet egyik építőeleme a szemcsék közötti határ. A szemcsehatár-szerkezet módosításával jelentősen megváltoztathatunk egyes anyagtulajdonságokat.

Több évtizede képezi kutatások témáját, hogyan lehet a szemcsehatárok geometriai leírásából következtetni azok tulajdonságaira. Jelen cikk a szemcsehatár-szerkezet jellemzésére legelterjedtebben használt megközelítés, a CSL (coincidence site lattice) modellről, annak alkalmazhatóságáról, érvényességéről nyújt áttekintést.

Kulcsszavak:

szemcsehatár, GBE, szemcsehatár energia, szemcsehatár-sík, orientáció különbség, CSL

1. Bevezetés

Polikristályos szerkezeti anyagaink térfogatának általában csak néhány tized százalékát teszik ki (a szemcsemérettől függően) a szemcséket elválasztó határok. A tulajdonságokra gyakorolt hatásuk azonban ennél jóval nagyobb jelentőségű.

A károsodási folyamatok jó része a szemcsehatárokon megy végbe. Jól ismert az anyagok kúszására gyakorolt hatásuk [1], a szemcsehatárokon keletkező mikrorepedések és terjedésük hatása a törési viselkedésre [2], fáradásra [3]. A szemcsehatárokon megjelenő kiválások [4] nagyban befolyásolják a szemcséközi- [4] és feszültségkorrózióra [5] való hajlamot. Hatással lehetnek többek között a hegeszthetőségre [6], a villamos- és mágneses tulajdonságokra.

Az 50-es évektől jelentek meg azok a munkák, amelyek összefüggésekre mutattak rá a szemcsehatárok tulajdonságai és azok szerkezete között. 1984-ben Watanabe [7] ezek alapján vezetett be egy új mikroszerkezeti paramétert az ún. „grain boundary character distribution”-t (GBCD, „szemcsehatár-jellemzők eloszlása”), illetve erre támaszkodva alkotta meg a „szemcsehatár tervezés” (grain boundary engineering, GBE) koncepcióját.

2. Szemcsehatárok jellemzői

A polikristályos fémeket eltérő kristálytani irányítottságú krisztallitok építik fel. Verő [8] megfogalmazásában a szemcsehatár az a réteg, ahol az orientáció ugrásszerűen megváltozik. Az eltérő orientációval találkozó szemcsék találkozásánál nem tartható a fémrács szabályossága, egy zavart zóna keletkezik, ami elválasztja a szomszédos szemcséket. A szemcsehatár tehát tekinthető egy rétegződési hibának, ami jellegéből adódóan nagyobb energiával rendelkezik, mint az általa elválasztott szabályos fémrácsú szemcsék.

Ezekből adódóan a szemcsehatárok tulajdonságai tág határok között változhatnak szerkezetüktől függően. A szemcsehatárok geometriája öt független változó (szabadsági fok) segítségével írható le. Három szabadsági fokkal adható meg a szomszédos szemcsék orientációinak különbsége (orientáció eltérés tengelye:2, ~szöge:1), kettővel jellemezhető a határ síkjának kristálytani orientációja. Ezzel egyenértékű a mindkét szemcse határsíkjai orientációival (két-két szabadsági fok) és orientáció eltérésük szögével (egy szabadsági fok) történő leírás [9].

3. Szemcsehatárok osztályozása, a CSL-modell

Bizonyos szemcsehatárok jelentősen eltérő, speciális tulajdonságokat mutatnak másokhoz képest. Ezek mint „speciális” határok jelennek meg a szakirodalomban. Jellemzőjük a kis szabadenergia; a kismértékű ötvöző diffúzivitás; a kis hajlam a kiválások és második fázisok csíráinak megjelenésére; kis, vagy ellenkezőleg, nagyon nagy mobilitás; kis villamos ellenállás; stb. [10] E jellemzők nagyban befolyásolják a már említett makroszkopikus anyagtulajdonságokat. A speciális tulajdonságok megjelenése erősen kapcsolódik a szemcsehatárok szerkezetéhez, geometriájához. Bebizonyosodott, hogy a speciális tulajdonságok és a határok geometriája közötti összefüggés megfelelő leírásához mind az öt szabadsági fok szükséges, ám a tulajdonságok és a geometria pontos kapcsolata még pontosan nem feltérképezett [11].

Egy geometriai megközelítés szerint egy speciális szemcsehatár olyan két krisztallit közötti határ, mely közel esik egy krisztallográfiai transzformációhoz [11]. Eszerint a speciális tulajdonságok meglétének feltétele, hogy a határ síkja minél közelebb essen egy alacsony indexű kristálytani síkhoz (pl.: {111}, {100}), és a szemcsehatárt alkotó atomok minél nagyobb arányban vegyenek fel olyan pozíciót, hogy mindkét szemcse rácsába illeszkedjenek.

Az orientáció-eltérés szerint megkülönböztethetünk kis- és nagyszögű szemcsehatárokat. Amennyiben két szemcsét úgy forgatunk, hogy orientációik megegyezzenek, egy képzeletbeli határ keletkezik, ahol az atomok tökéletesen illeszkednek a rácsba. Megfelelően kis szöggel elfordítva a két szemcsét egymáshoz képest az atomok illeszkedése még mindig közel tökéletes lesz, a határfelületet rétegződési hibák képesek kitölteni (vakanciák, diszlokációk). Ekkor a szemcsehatár energiája a rétegződési hibák energiájával azonos nagyságrendű, speciális helyzetről, speciális szemcsehatárról beszélhetünk. Az ilyen kisszögű határokhoz tartozó maximális szögeltérés (a tökéletes illeszkedéshez képesti hiba) meghatározása nem egyértelmű, 10°, 15°, 18°-os határértékekkel találkozhatunk a szakirodalomban [12]. Ennél nagyobb

orientációkülönbség (nagyszögű szemcsehatárok) esetén a határfelület elveszíti koherenciáját, energiája nagyságrendekkel megnő.

Az 50-es évek óta tartó kutatások során bizonyossá vált, hogy egyes nagyszögű határok speciális tulajdonságokat mutatnak [11]. Léteznek olyan orientáció-eltérések két szomszédos szemcse között, amelyek esetén az egymásra vetített rácsok egyes pontjai egybeesnek. Ez az egybeeső pontok által képezett virtuális rács az ún. „coidence site lattice” (CSL). Az ilyen rácsokat az egybeesések gyakoriságának reciprokával szokás jellemezni, amit egy Σ érték jelképez. A $\Sigma 5$ jelölés tehát azt jelenti, ha a két rács fedné egymást, minden ötödik rácspontra egybeesne. Bár a CSL-modell a szemcsehatárokat csak közvetetten jellemzi, a CSL határok (a CSL „pozíciójú” szemcséket elválasztó határok) igazoltan speciális tulajdonságokat mutatnak a többi nagyszögű szemcsehatárhoz (általános, vagy véletlenszerű határok) képest [1-7]. Jó példa erre az ikerhatárok esete. Ezek $\Sigma 3$ CSL határként írhatók le, és energiájuk egy nagyságrendbe esik a rétegződési hibák energiájával [9]. Több tanulmány foglalkozik azzal, mekkora egybeesés (Σ érték) esetén beszélhetünk még speciális tulajdonságokról, illetve az ideálistól való mekkora szögeltérésen belül tekintjük egybeesőknek a rácspontokat [10].

4. A CSL-modell alkalmazhatósága

A CSL-modell, pusztán orientáción alapuló megközelítése miatt, máig tartó viták keresztüzébe került [9-11]. A kérdés, hogy alkalmazható-e a CSL-modell a speciális szemcsehatárok leírására?

A $\Sigma 3$ határok nagyobb része nem koherens ikerhatár, azoknál nagyobb energiával rendelkezik (bár így is lényegesen kisebb, mint a véletlenszerű határok), ami egy példa arra, hogy a határ szerkezetének ismerete nélkül nem vonhatók le messzemenő következtetések azok tulajdonságaira vonatkozóan. Mégis gyakran előfordul az „alacsony Σ értékű” és a „speciális” határ fogalmának egyenértékű használata. Ez részben köszönhető a napjainkra nagymértékben automatizálódott, egyszerűen kezelhető, nagy mennyiségű adat gyors feldolgozására alkalmas, speciális ismereteket gyakorlatilag nem igénylő vizsgálati technológia (SEM EBSD) fejlődésének és elterjedésének [11].

A koherens ikerhatárok szerkezetéből következően a kis energiának nem elégséges feltétele a CSL (egybeeső pontokból képzett rács) megléte. A határ síkjának minél többet kell tartalmaznia a „közös” rácshelyekből [11]. A vizsgálati technológiák fejlődése ellenére a szemcsehatár szerkezetének pontos jellemzése igen bonyolult és időigényes feladat, nagy mennyiséget leírni pedig szinte elképzelhetetlen. Az orientációs vizsgálatok során megfelelő mérési paraméterek beállításával és helyes vizsgálati koncepcióval elkerülhetők a hamis következtetések. Például a határok minél nagyobb populációját célszerű vizsgálni; helyesen kell megválasztani a kritériumokat az értékeléshez (kisszögű szemcsehatár, CSL-től való eltérés, stb.); a hangsúlyt nem az egyes határok, hanem a tulajdonságok eloszlásának vizsgálatára kell helyezni; stb. [11] Amennyiben a vizsgáló szeme előtt lebeg a CSL-modell valódi jelentése és alkalmazási korlátai, jól használható adatokat nyerhet az elemzett minta szemcsehatár-szerkezetéről.

Irodalom

[1] E. M. Lehigh, G. Palumbo: *On the creep behaviour of grain boundary engineered nickel*, Materials

Science and Engineering A237, 1997, 168- 172. o.

- [2] B. W. Reed, M. Kumar, R. W. Minich, R. E. Rudd: *Fracture roughness scaling and its correlation with grain boundary network structure*, Acta Materialia 56, 2008, 3278–3289. o.
- [3] S. Kobayashi, T. Inomata, H. Kobayashi, S. Tsurekawa, T. Watanabe: *Effects of grain boundary- and triple junction-character on intergranular fatigue crack nucleation in polycrystalline aluminum*, J Mater Sci 43, 2008, 3792–3799. o.
- [4] P. Lin, G. Palumbo, U. Erb, K. T. Aust: *Influence of grain boundary character distribution on sensitization and intergranular corrosion of alloy 600*, Scripta Metallurgica et Materialia, Vol. 33, No. 9, 1995, 1387-1392. o.
- [5] Y. Pan, B. L. Adams, T. Olson, N. Panayotou: *Grain-boundary structure effects on intergranular stress corrosion cracking of alloy X-750*, Acta mater. Vol. 44. No. 12, 1996, 4685-4695. o.
- [6] H. Kokawa: *Weld decay-resistant austenitic stainless steel by grain boundary engineering*, Journal of Materials Science 40, 2005, 927– 932. o.
- [7] T. Watanabe: *An approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals*, Res Mech. 11, 1984, 47– 84. o.
- [8] Verő, B.: *Az átalakuló acélok austenitjének sokkristályos állapota*, Kandidátusi értekezés, Budapest, 1980
- [9] V. Randle: *Twinning-related grain boundary engineering*, Acta Materialia 52, 2004, 4067–4081. o.
- [10] A. H. King, S. Shekhar: *What does it mean to be special? The significance and application of the Brandon criterion*, J Mater Sci 41, 2006, 7675–7682. o.
- [11] V. Randle: *The coincidence site lattice and the 'sigma enigma'*, Materials Characterization 47, 2001, 411–416. o.
- [12] J. C. Huang, I. C. Hsiao, T. D. Wang, B. Y. Lou: *EBSD study on grain boundary characteristics in fine-grained Al alloys*, Scripta mater. 43, 2000, 213–220. o.

Varga Péter, tanársegéd

Munkahely: Óbudai Egyetem, Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar, Anyag- és Alakítástechnológiai Szakcsoport

Cím: 1081, Magyarország, Budapest, Népszínház u. 8.

Telefon / Fax: +36-1-6665402

E-mail: varga.peter@bgk.uni-obuda.hu